

дает по размерам с областью существования объемного заряда, поэтому эффект двулучепреломления естественно связать с наличием объемного заряда. Действительно, анизотропия связана с квазикристалличностью, т.е. кристалл формируется неподвижными заряженными частицами нафiona, поскольку пространственно устойчивое взаимное расположение заряженных частиц может быть реализовано только в виде коллоидного кристалла.

1. Bunkin N.F., Kozlov V.A., Suyazov N.V. et al., Physics of Wave Phenomena, 4, 255–264 (2015).
2. Bunkin N.F., Kozlov V.A., Ignatiev P.S. et al., Water, 4, 129 – 154 (2013).
3. Bunkin N.F., Gorelik V.S., Kozlov V.A., et al., J. Phys. Chem. B, 118, 3372-3377 (2014).

LOCAL POLARIZATION RESERVAL IN WAVEGUIDES CREATED IN LITHIUM NIOBATE SINGLE CRYSTALS BY HIGH ENERGY ION IRRADIATION

Norboboev B.G.^{1*}, Alikin D.O.¹, Neradovskiy M.M.¹, Pryakhina V.I.¹,
Shur V.Ya.¹, Carrascosa M.², Olivares J.³

¹⁾ Ferroelectrics laboratory, Institute of Natural Sciences, Ural Federal University, 620000, Ekaterinburg, Russia

²⁾ Departamento de Fisica de Materiales, Universidad Autonoma de Madrid, Spain

³⁾ Centro de Microanálisis de Materiales, Universidad Autonoma de Madrid, Spain

*E-mail: norboboev_botir@mail.ru

Irradiation by swift heavy ions has shown to be a powerful and unique method that allows to fabricate low loss optical waveguides in LiNbO₃ [1,2]. Creation of the buried damage layers complemented by electrical poling looks attractive for the micro- and nanodomain engineering because of permit the better control of the domain periods.

In this contribution, we used piezoresponse force microscopy (PFM) for studying of domain growth inside optical waveguides created in congruent LiNbO₃ (CLN) by high energy ion irradiation. We irradiate Z⁺ surface by 22-30 MeV energy, 2-4•10¹⁴ cm⁻² fluence F⁶⁺ ions in order to produce buried amorphous layer with the depth from 1 to 4.5 μm which play a role of optical barrier for the propagating light [1].

Dependences of the average domain radius on the amplitude and duration of the applied voltage pulse have been obtained for the different irradiation conditions. Dependence on the thickness of waveguide demonstrated decrease of threshold field of domain nucleation and consequently increase of the average domain radius. Size effect have been carefully examined. The produced domains were stable for hundreds of hours. Confocal Raman microscopy have been used to inspect depth of formed domains. The obtained results look quite attractive for the domain engineering.

The equipment of the Ural Center for Shared Use “Modern Nanotechnology” Ural Federal University has been used.

1. Olivares J., García G., et al., Appl. Phys. Lett. 86, 183501 (2005).
2. Jubera M., Garcia-Cabañes A., et al., Appl. Phys. B, 116, 507 (2014).

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ Tm^{2+} И Eu^{2+} В $SrCl_2$ И MeF_2 ($Me = Ca, Sr, Ba$): ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ РАСЧЕТ

Сердцев А.В.*, Чернышев В.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: saxara1994@yandex.ru

CRISTALLINE STRUCTURE OF Tm^{2+} AND Eu^{2+} IMPURITY CENTERS IN $SrCl_2$ AND MeF_2 ($ME = Ca, Sr, Ba$): FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

Serdceev A.V.*, Chernyshev V.A.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The ab initio calculations of single impurity centers Tm^{2+} and Eu^{2+} in $SrCl_2$ and MeF_2 ($Me = Ca, Sr, Ba$) have been done. The crystal structure of single impurity centers was calculated.

Кристаллы со структурой флюорита $SrCl_2$ и MeF_2 ($Me = Ca, Sr, Ba$), активированные редкоземельными ионами R^{2+} , привлекают внимание исследователей как перспективные материалы для лазеров УФ диапазона [1]. В работе в рамках *ab initio* подхода исследована кристаллическая структура окружения точечных примесных центров Tm^{2+} и Eu^{2+} в $SrCl_2$ и MeF_2 , а также фоновый спектр активированных матриц.

Использовалась программа CRYSTAL09 [2], предназначенная для моделирования периодических структур в приближении МО ЛКАО. Проведенные расчеты показали, что использование гибридных функционалов B3LYP и PBE0 с оптимизацией базисных наборов позволяет воспроизвести кристаллическую структуру и ширину запрещенной щели кристаллических матриц достаточно хорошо – результаты совпадают с экспериментом в пределах погрешности.

Все методы качественно предсказывают одну и ту же картину искажений кристаллической решетки вблизи примесного иона R^{2+} . Максимально искажается первая координационная сфера (сжатие на ~ 0.02 Å (Tm^{2+}) и расширение на ~ 0.02 Å (Eu^{2+})), а смещения в следующих сферах не превышают 0.01 Å. Полученные результаты согласуются с данными ДЭЯР в пределах погрешности (Табл. 1).

Таблица 1. Радиальные координаты ионов (Å)
вблизи примесных центров MeF_2 : Tm^{2+} (PBE0 функционал).